



TITLE:

実時空格子上の経路和法(量子情報理論とその応用)

AUTHOR(S):

山田, 徳史; 高木, 伸

CITATION:

山田, 徳史 ...[et al]. 実時空格子上の経路和法(量子情報理論とその応用). 数理解析研究所講究録 1994, 885: 163-177

ISSUE DATE:

1994-09

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/84289>

RIGHT:

実時空格子上の経路和法

東北大理物理 山田徳史 (Norifumi Yamada)

東北大理物理 高木伸 (Shin Takagi)

§1 序

量子力学の定式化の一つにファインマンによる経路積分法がある [1]。これは波動関数のプロパゲータを、「時空間における重み付き経路の和」として与えるものである。一次元を運動する非相対論的自由粒子を考えると、 $(0, 0)$ と (X, T) を結ぶプロパゲータ $\Phi(X, T; 0, 0)$ は

$$\Phi(X, T; 0, 0) = \sum_{(X, T) \leftarrow (0, 0)} e^{iS} = \sqrt{\frac{1}{2\pi iT}} \exp\left(i\frac{X^2}{2T}\right) \quad (1)$$

で与えられる ($m/\hbar = 1$ の単位系を使う)。 S は作用で、和は端点を結び時間的に前進する全ての経路にわたる経路和である。「経路にわたって和を取る」というのはイメージとしては簡単だが、実際にどうやって和を取るかとなると話は別である。実際ファインマン経路積分では経路和は無限多重積分で定義され、(1) の和はそれを単に記号的にかいたものである。経路和がそのような「複雑な仕掛け」で表わされるようになったのは、ファインマンが最初から経路和の概念を量子力学に導入しようとして経路積分法を開発したわけではないからだとは考えられないだろうか。もともとのファインマンの目的はラグランジアンを出発点にした量子力学を構成することであって、そうして出来上がった定式化に対して、後から経路和の解釈がついたのである [2]。いずれにしても、ファインマン経路積分における無限多重積分という「仕掛け」は、それが経路和を表わすものだという「解釈」の単純さに比べて少々複雑なように思える。経路積分法の開発の初期にはファ

インマン自身このように感じていたようだ (§4 の最後の引用文参照)。また無限多重積分の形式では「個々の経路に振幅 e^{iS} が付随している」という言い方がされるが、これはより正確な内容の荒っぽい表現に過ぎない。実際に確率振幅が付随しているのは経路の束 (cylinder set) [3] であって、個々の経路なのではない。

解釈が単純なら仕掛けも単純な方がよい。本稿では解釈の単純さに釣り合うだけの単純な仕掛けで経路和を定義することを考え、それによって生じる利点について議論する。具体的には、非相対論的な粒子の量子力学の範囲内で「経路を一つ一つ足し上げる」という経路和の描像に忠実な定式化を行う。これは何も難しいものではなくて、次のようにすればよい。時間と空間を離散化してシュレディンガー方程式を格子時空上の差分方程式にする。それを iteration で解いて、最後に連続極限をとるのである。このなかで差分方程式を iteration で解く部分が格子上の経路和として表現できる。従って流れを逆に辿って次のスキームが得られる。

$$\sum_{\text{paths}} \mu(\text{path}) \rightarrow \Phi \quad (2)$$

ここで μ は個々の格子路の重み、和は指定された端点を持つ全ての格子路にわたる経路和で、矢印は経路和を計算した後にとる連続極限を表わす。重み μ はシュレディンガー方程式を差分化することで自然に得られ well-defined である。また、格子路は一つ一つ数えられるから、格子路を足し上げるための \sum は一個の離散的な和である。さらに、プロパゲータの計算では経路の端点が固定されるが、指定された端点を結ぶ格子路は有限個である。つまり (2) の経路和は、個々の格子路に付随する well-defined な重みを有限個の格子路にわたって一つ一つ足し上げるものであり、経路和の素朴なイメージとぴったりである。このため無限多重積分による定式化に比べ経路の取扱いがより直接的となる。さて (2) のスキームが成り立つこと自体はきわめて当たり前のことなので、「確かに素朴なイメージとぴったりだが、そのような審美的なこと以外に何か実益があるのか？」という疑問が起こるかもしれない。実は格子上の経路和法では容易にできるが、無限多

重積分による通常の方法ではできないか、少なくとも容易ではないことがあるのである。§3で議論するが、それは経路が特定の時空領域に制限される場合の経路和の計算である。無限多重積分による定式化では積分範囲を制限すると足し上げられる経路が制限を受けると直観的には考えられる。しかし経路の制限に対応すべき積分範囲の制限がどういうものかはっきりしない場合があるのである。これに対して格子上の経路和法では経路は一つ一つ数えられるので、和の範囲と足し上げられる経路との関係は常にはっきりしている。実は、(2)と内容的に同じことが経路積分の測度問題の議論の中ですでに示されている事を後になって知ったが[4]、本稿ではそれとは異なった動機、視点(2)は無限多重積分の形式と全く同じなのかどうか)及び方法で議論する。特に§3の議論を通して独自の問題提起を行う。以下ではまず上に述べた方法に沿って(2)を構成し、次に経路が特定の時空領域に制限される場合を扱って、格子上の経路和法の利点を見ることにする。

§2 格子上の経路和

プロバゲータ $\Phi(X, T; 0, 0)$ はシュレディンガー方程式

$$i \frac{\partial \Phi(X, T; 0, 0)}{\partial T} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi(X, T; 0, 0)}{\partial X^2} \quad (3)$$

の、初期条件

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Phi(X, T; 0, 0) = \delta(X) \quad (4)$$

を満たす解である。通常の差分化スキーム $\partial \Phi(X, T)/\partial T \approx (\Phi(X, T + \Delta T) - \Phi(X, T))/\Delta T$ などを用いると、(3)は次のように差分化される。

$$\begin{aligned} \Phi(X, T + \Delta T) = & (1 - \gamma i) \Phi(X, T) \\ & + \frac{\gamma i}{2} \Phi(X - \Delta X, T) + \frac{\gamma i}{2} \Phi(X + \Delta X, T), \quad \gamma \equiv \frac{\Delta T}{(\Delta X)^2} \end{aligned} \quad (5)$$

ここで $\Phi(X, T; 0, 0)$ を単に $\Phi(X, T)$ と書いた。空間幅と時間幅の取り方で決まる γ は0でない有限(以下

単に「有限」の定数である。(5)式から(3)式を導くときには γ を有限に保って $\Delta X \rightarrow 0$ の極限をとる。

これはよく知られた diffusion limit で、以後これを Lim で表わすことにする。さて、(5)は差分方程式ではあるが、連続時空の変数で書かれ、 Φ も連続時空上で定義された量であるので、まだ連続時空上の式である。これを格子時空上の式に書き換えよう。まず

$$x \equiv \frac{X}{\Delta X}, \quad t \equiv \frac{T}{\Delta T} \quad (6)$$

が整数値をとる点 (X, T) からなる格子時空を考える。格子時空の座標として $[x, t]$ を用いる。 (X, T) と $[x, t]$ とは同じ時空点である。ここで、連続時空上の $\Phi(X, T; 0, 0)$ に対応する格子時空上の量 $u[x, t; 0, 0]$ が存在して両者は

$$\Phi(X, T; 0, 0) = \text{Lim} \frac{1}{\Delta X} u[X/\Delta X, T/\Delta T; 0, 0] \quad (7)$$

で結ばれていると考える。(4)に対応して、 u は初期条件

$$u[x, 0; 0, 0] = \delta_{x,0} \quad (8)$$

を満たすとする。(7)式の右辺の $1/\Delta X$ は(4)と(8)との対応関係を保証するためのものである。(7)を(5)式に代入して、(5)を再現する u の式として最も簡単なものを求めると

$$u[x, t+1; 0, 0] = (1 - \gamma_i)u[x, t; 0, 0] + \frac{\gamma_i}{2}u[x-1, t; 0, 0] + \frac{\gamma_i}{2}u[x+1, t; 0, 0] \quad (9)$$

となる。(8)と(9)によって $u[x, t; 0, 0]$ は一意に決まり、従ってもととも仮定として設定した(7)を確かめることができる。これは後で行うが、そうして初めて上で行った $u[x, t; 0, 0]$ の導入が正当化される。さて、(9)は完全に格子時空上の差分方程式である。(9)と(8)はそれぞれ(3)と(4)の格子時空版であ

り、次のような格子上的「複素ランダムウォーク」を記述するものとして理解できる。格子点を渡り歩く粒子を考えよう。粒子は $t = 0$ に $x = 0$ を出発し、 $t = 1$ では $x = 0, \pm 1$ のいずれかに遷移している (Fig. 1)。 $x = 0$ への遷移を \uparrow 、 $x = \pm 1$ への遷移をそれぞれ \nearrow と \searrow で表わすと、 \uparrow 、 \nearrow 、 \searrow が起こる「複

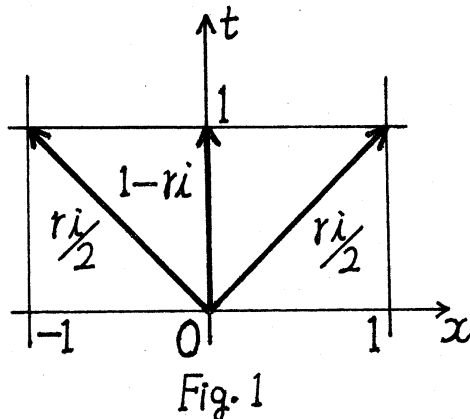


Fig. 1

素遷移確率」がそれぞれ $1 - \gamma i$ 、 $\gamma i/2$ 、 $\gamma i/2$ である (全遷移確率は 1)。以後同様に各格子点 $[x, t]$ において粒子は三通りの遷移が許される。その結果この粒子が時刻 t に位置 x にいる「複素確率」が $u[x, t; 0, 0]$ である。全遷移確率が 1 なので $t \geq 0$ に対して $\sum_x u[x, t; 0, 0] = 1$ が成り立つ。

初期条件 (8) から出発して差分方程式 (9) を iteration で解くことにより複素確率 $u[x, t; 0, 0]$ を求めることができる。終点 $[x, t]$ を固定して解いた結果を眺めると、 $[0, 0]$ と $[x, t]$ を結ぶ個々の格子路に付随する重みを時間的に前進する全ての格子路にわたって足し上げたものが u であることがわかる。すなわち、重みを μ として

$$u[x, t; 0, 0] = \sum_{[x, t] \leftarrow [0, 0]} \mu(\text{path}) \quad (10)$$

和は上述のもので、経路に付随する重み μ は経路に沿って遷移確率を掛け合わせたものである。(10) と (7) から、

$$\text{Lim} \left[\frac{1}{\Delta X} \left(\sum_{[x, t] \leftarrow [0, 0]} \mu(\text{path}) \right)_{\substack{x=X/\Delta X \\ t=T/\Delta T}} \right] = \Phi(X, T; 0, 0) \quad (11)$$

が得られる。これが最初に述べた (2) のスキームの具体的な形である。ファインマン経路積分の場合と違い、(11) の経路和は一個の離散的な和 \sum で定義されている。また和は有限個の格子路にわたるものである。但しまだ (7) を確かめていないので、(11) もまだ確立されたわけではない。(7) と (11) は同じものだから、経

路和を求めて Lim を計算し直接 (11) が成り立つことを示そう。

格子路は時間的に前進するから、 $[0, 0]$ と $[x, t]$ とを結ぶ格子路は \uparrow 、 \nearrow 、 \searrow が t 個組合わさってできている。いま一本の格子路に着目し、それが s 回の \uparrow 、 r 回の \nearrow 、 l 回の \searrow で構成されているとすると、 $s + r + l = t$ と $r - l = x$ が成り立つ。これから $r = (t - s + x)/2$ 、 $l = (t - s - x)/2$ となり、固定した端点間では r と l の値は s の値によって決ってしまうことがわかる。 s 個の \uparrow を持つ格子路の重み $\mu(\text{path})$ を $\mu(s)$ と書くと、

$$\mu(s) = (1 - \gamma_i)^s \left(\frac{\gamma_i}{2}\right)^{(t-s+x)/2} \left(\frac{\gamma_i}{2}\right)^{(t-s-x)/2} \quad (12)$$

となる。そのような格子路の数 $N(s)$ は、 t ステップの中から s 、 r 、 l 個の遷移を選び出す組合せの数に等しい。従って

$$\begin{aligned} u[x, t; 0, 0] &= \sum_s N(s) \mu(s) \\ &= \sum_s \binom{t}{s, \frac{t-s+x}{2}, \frac{t-s-x}{2}} (1 - \gamma_i)^s \left(\frac{\gamma_i}{2}\right)^{(t-s+x)/2} \left(\frac{\gamma_i}{2}\right)^{(t-s-x)/2} \end{aligned} \quad (13)$$

\uparrow は最大で $t - |x|$ 回許される。また、 $t - |x|$ が偶数の場合には \uparrow なしで $[0, 0]$ と $[x, t]$ を結べるが、奇数の場合には少なくとも一回の \uparrow が必要となる。従って

$$\sum_s \equiv \begin{cases} \sum_{s=0}^{t-|x|} & (t - |x| = \text{偶}) \\ \sum_{s=1}^{t-|x|} & (t - |x| = \text{奇}) \end{cases} \quad (14)$$

である。プライムは和が一つおきに取られることを示す。(13) と (14) により、 u を格子上の経路和として完全に表現できたことになる。かつて u がこのような形で求められたことはないようである。

u の連続極限をとるために (13) をコンパクトな形に変形する。(13) の被加数は

$$\binom{t}{s, r, l} (1 - \gamma_i)^s (\gamma_i/2)^r (\gamma_i/2)^l \delta_{r-l, x} \delta_{s+r+l, t} \quad (15)$$

と書ける。クロネッカーのデルタがあるので和の範囲を全ての整数 s 、 r 、 l へと広げられる。さらに

$$\delta_{r-l,x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-i(r-l-x)\theta} \quad (16)$$

を使って

$$\begin{aligned} u[x, t; 0, 0] &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta x} \sum_{s,r,l} \binom{t}{s, r, l} (1 - \gamma i)^s (\gamma i e^{-i\theta}/2)^r (\gamma i e^{i\theta}/2)^l \delta_{s+r+l,t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta x} (1 - \gamma i + \gamma i \cos \theta)^t \end{aligned} \quad (17)$$

を得る。最後の表式に移るときに多項定理を用いた。(17)の二行目が(8)と(9)を満たすことは容易に確かめられる。ところでその二行目自体はもっと簡単に、差分方程式(9)をフーリエ変換の方法で解いて求めることができる。すなわち、

$$u[x, t; 0, 0] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta x} \tilde{u}[\theta, t] \quad (18)$$

を(9)に代入すると漸化式 $\tilde{u}[\theta, t] = (1 - \lambda i + \lambda i \cos \theta) \tilde{u}[\theta, t-1]$ を得る。これと(8)から決まる $\tilde{u}[\theta, 0] = 1$ を合わせて、 $\tilde{u}[\theta, t] = (1 - \lambda i + \lambda i \cos \theta)^t$ が求まる。(17)の二行目は u に関する計算を行う上で便利がよいが、我々にとって大切なのは u が(13)のように経路和の形に書けるという事である。ついでに言えば、(13)から(17)を導くことにより、(17)の θ 積分の意味が格子上のランダムウォークの観点から明らかになった。 θ 積分は(16)を介して拘束条件 $r - l = x$ を取り入れているのである。

さて(11)を証明しよう。(6)を用いて(17)の二行目を連続座標で書き、その結果を ΔX で割り、積分変数を θ から $K \equiv \theta/\Delta X$ に変えると、

$$\frac{1}{\Delta X} u[X/\Delta X, T/\Delta T; 0, 0] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta X}^{\pi/\Delta X} dK e^{iKX} (1 - \gamma i + \gamma i \cos K\Delta X)^{T/\Delta T} \quad (19)$$

を得る。これが(11)の左辺の $[]$ の中身である。Lim の評価を次のように行う。まず(19)の右辺の積分

範囲を $(-\infty, \infty)$ に広げ、それとは別に被積分関数の \cos を含む部分の diffusion limit を計算して

$$\left(1 - \frac{\gamma i (K \Delta X)^2}{2} + O((\Delta X)^4)\right)^{T/\Delta T} \rightarrow \exp\left(-i \frac{\gamma (\Delta X)^2 K^2 T}{2 \Delta T}\right) = \exp(-i K^2 T/2) \quad (20)$$

を得る。こうして

$$\lim_{\Delta X} \frac{1}{\Delta X} u[X/\Delta X, T/\Delta T; 0, 0] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dK \exp(i K X - i K^2 T/2) \quad (21)$$

を得る。右辺の積分は (1) の右辺の表式を与え、従って (11) が証明された。数学としては上の極限操作を正当化する作業が残っているが、ここではそれには立ち入らないことにする。文献 4(1991) では重み (12) が無限小解析とフーリエ変換を用いて扱われ、ファインマン経路積分が数学的に厳密に再構成されている。

§3 初到達時刻の振幅への応用

前章で、格子上の経路和からプロパゲータを計算するスキーム (11) が出来上がった。プロパゲータの計算では (指定された端点を結ぶ) 全ての経路を足し上げるが、足し上げる経路を適当に制限すると制限の仕方に依拠していろいろな振幅が求まる。格子上では経路を一本一本数えることができるから、「経路の制限」をどうやって実現したらよいかは自明なことである。すなわち、(11) の左辺の和の範囲を制限することにより欲しい経路だけをピックアップすればよいのである。一方ファインマン経路積分では、(無限多重積分の) 積分範囲をどのように制限すれば欲しい経路をピックアップできるのかがはっきりしない場合がある。ここでは、「初到達時刻の振幅」と呼ぶ振幅の計算を通してこの事を見ることにする。なお、本章では $\gamma = 1$ ととる。

$(X, 0)$ と $(0, T)$ を結び ($X, T > 0$ とする)、終時刻 T 以前には領域 $X \leq 0$ に侵入しないような経路にわたる経路和を考え、それを $F(T, X)$ と表わそう。正確に言うと、終点には一旦時間幅 ΔT を持たせ、 ΔT の間に $X = 0$ に初めて到達する経路 (Fig. 2) について経路和を計算し、最後に ΔT で割って $\Delta T \rightarrow 0$ の極限をとる。記号的に書けば

$$F(T, X) \equiv \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta T} \sum_{(0, T \in \Delta T) \leftarrow (0, 0)} e^{iS} \quad (22)$$

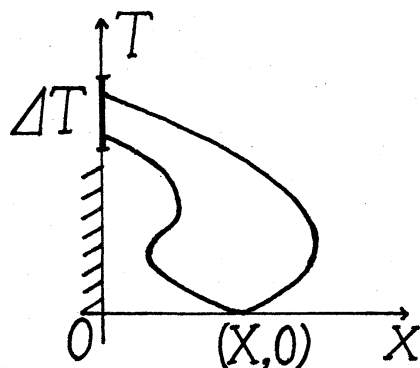


Fig. 2

である。ここで経路和は領域 $X > 0$ に制限される。 F に寄与する経路は終時刻 T で初めて $X = 0$ に到達するので、 F を「 $(X, 0)$ を出発した粒子が $X = 0$ に初到達する時刻が T である振幅」、略して「初到達時刻の振幅」と呼ぶことにする。さて、ファインマン経路積分では積分範囲を制限すると足し上げられる経路が制限されると考

えられよう。積分範囲を制限されたファインマン経路積分は

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{\Delta X_j} dX_j (2\pi i \epsilon)^{-N/2} \exp \left(i \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(X_{k+1} - X_k)^2}{2\epsilon} \right) \quad (23)$$

である。ここで $N \equiv (T_B - T_A)/\epsilon$ 、 $X_0 \equiv X_A$ 、 $X_N \equiv X_B$ 。(23)は、 (X_A, T_A) と (X_B, T_B) とを結び、途中の時刻 T_j に空間幅 ΔX_j を通過する経路にわたる経路和である。(23)では経路は空間ゲートの時系列 $\{\Delta X_j\}$ (cylinder set) によって指定されていることに注意しよう。一方、我々が計算しようとしている(22)では経路は時間ゲート ΔT で指定されている。このような時間ゲートで通過場所を指定された経路は、無限多重積分の文脈でどのように扱ったらよいのかははっきりしない。また、 ΔT 以前には経路は半空間 $X > 0$ に制限されていなければならないが、これも無限多重積分の方法では次に述べるような問題を生じる。 (X_j, T_j) と (X_{j+1}, T_{j+1}) を結ぶ経路を考えよう ($T_j \equiv T_A + j\epsilon$)。結び方は無限にあるので、たとえば $X_j, X_{j+1} > 0$ であっても時間 ϵ の間に $X < 0$ に侵入する経路がある。従って、離散的な各時刻 T_j で経路を半空間 $X > 0$ に制限しても、連続時間で見たとときに経路がやはりその半空間に制限されているという保証はない。もちろん $X < 0$ への侵入が連続時間極限 $\epsilon \rightarrow 0$ で無視できればよいのであるが、それを示すための極限評価が一筋縄ではいかず、筆者はいまだ成功していない。このように言うと、「そもそも(22)の

ような経路和は定義されないのではないか？」という反応が返ってくるかもしれないが、それは違う。 F は一意に決まる。それには次のように考えればよい。 $X_B < 0 < X_A$ として $(X_A, 0)$ と (X_B, T_B) を結ぶ経路を考える ($T_B > 0$)。そのような経路は必ず $X = 0$ と交わるので、経路が $X = 0$ に初めて到達する時刻 T ($0 < T < T_B$) をラベルとして全経路を分類できる。逆に言うと、時刻 T に $X = 0$ に初到達する経路を T で足し上げれば全ての経路が尽くされる。時刻 T で $X = 0$ に初到達する経路は、 $(0, T)$ までは半空間 $X > 0$ に制限されるが、以後終点 (X_B, T_B) まではあらゆる行き方が可能である。従って次式が成り立つ。

$$\Phi(T_B|X_B, X_A) = \int_0^{T_B} dT \Phi(T_B - T|X_B, 0) F(T|X_A) \quad (24)$$

式の特徴が分かるように $\Phi(X'', T''; X', T')$ と $F(T, X)$ をそれぞれ $\Phi(T'' - T'|X'', X')$ 、 $F(T|X)$ と書いた。上式は、初到達時刻による経路分類を、経路に対応する振幅を用いて “amplitude decomposition” の形に書いたものである。(24) は時間変数に関してたたみ込みの形をしており、第一種ヴォルテラ型積分方程式である。 Φ は (1) で与えられ既知なので、(24) は F について解くことができる。結果だけ書くと、

$$F(T, X) = \left[\frac{X^2}{2\pi i T^3} \right]^{1/2} \exp \left(i \frac{X^2}{2T} \right) \quad (25)$$

となり、 F ははっきりと定まる。この結果あるいは (24) を無限多重積分の形式から出せばよいのだが、筆者の知る限りそれにはっきりと成功した例はない。(24) の形をした式がトンネル問題に絡んで持ち出されることがあるが、それらは文献 5 にその根拠を求めている。文献 5 では、上に述べた経路分類を無限多重積分の文脈で行って (24) の形の式を「導出」するのであるが、肝心なところ（上で述べた困難なところ）の扱いが非自明な仮定に基づいている。筆者はそれらが正当化できるかどうか調べているが、まだ結論はでていない。無限多重積分では F は計算できないとの断言もできないが、少なくとも容易ではないという印象である。これに対し以下で示すように、格子上の経路和法を用いると F は容易に計算できる。

格子上の経路和法を用いると F は次のように与えられるはずである。

$$\lim \left[\frac{1}{\Delta T} \left(\sum_{[0,t] \leftarrow [x,0]} \mu(\text{path}) \right)_{\substack{x=X/\Delta X \\ t=T/\Delta T}} \right] \quad (x, t > 0) \quad (26)$$

和は $[x, 0]$ と $[0, t]$ を結び、終時刻 t 以前には $x = 0$ に到達しないような経路にわたるものである (Fig. 3)。この経路和を $f[t, x]$ と表わす。 f を求める準備として、 $[x, 0]$ と $[0, t]$ を結び領域 $x \leq -1$ に侵入し

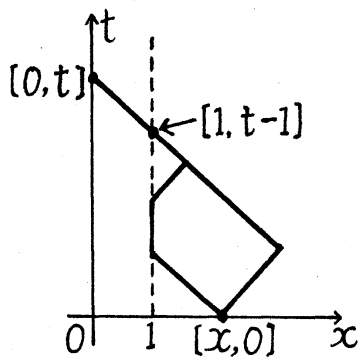


Fig. 3

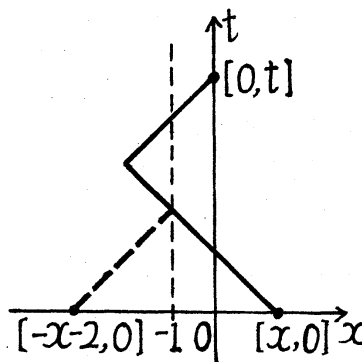


Fig. 4

ない経路にわたる経路和を考え、これを $\bar{f}[t, x]$ で表わす。 f と違い終時刻 t 以前に $x = 0$ に到達する経路も許されていることに注意。 \bar{f} を鏡像法で求める。まず $[x, 0]$ と $[0, t]$ を結ぶ全経路を考える。領域 $x < 0$ に侵入する経路の $x = -1$ に初到達する

までの部分を $x = -1$ に関して折り返すと $[-x-2, 0]$ と $[0, t]$ を結ぶ経路となる (Fig. 4)。折り返しによって経路の重みは変わらない。領域 $x \leq -1$ に侵入する全ての経路についてこの折返しをすると、 $[-x-2, 0]$ と $[0, t]$ とを結ぶ全経路が得られる。従って

$$\begin{aligned} \bar{f}[t, x] &= \sum_{[0,t] \leftarrow [x,0]} \mu(\text{path}) - \sum_{[0,t] \leftarrow [-x-2,0]} \mu(\text{path}) \\ &= u[0, t; x, 0] - u[0, t; -x-2, 0] \\ &= u[x, t; 0, 0] - u[x+2, t; 0, 0] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left(e^{i\theta x} - e^{i\theta(x+2)} \right) (1 - i + i \cos \theta)^t \end{aligned} \quad (27)$$

を得る。一行目の二つの経路和はいずれも端点を結ぶ全ての経路にわたるものである。二行目から三行目への移行では空間鏡影と空間並進に対する u の対称性を使った。 f に寄与する経路を $[1, t-1]$ までの部分と

そこから $[0, t]$ までの最後の一步とに分けて考えると、前者は \bar{f} に寄与するタイプの経路であり、原点をずらすことによって $\bar{f}[t-1, x-1]$ に等しいことがわかる。また後者は \sqrt{x} だから重み $i/2$ を与える。従って

$$\begin{aligned} f[t, x] &= \frac{i}{2} \bar{f}[t-1, x-1] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \sin \theta e^{i\theta x} (1-i+i\cos \theta)^{t-1} \\ &= \frac{x}{t} u[x, t; 0, 0] \end{aligned} \quad (28)$$

となる。二行目から三行目に移るとき、 $\sin \theta (1-i+i\cos \theta)^{t-1} = it^{-1} d/d\theta (1-i+i\cos \theta)^t$ に着目して部分積分を行った。(28) を用いて (26) を計算すると

$$\lim_{\Delta T} \frac{1}{\Delta T} \frac{X/\Delta X}{T/\Delta T} u[X/\Delta X, T/\Delta T; 0, 0] = \frac{X}{T} \Phi(X, T; 0, 0) \quad (29)$$

を得る (前章で証明した (7) を用いた)。(29) は (25) と一致し、従って (26) は確かに $F(T, X)$ を与える。

ここでは半空間 $X > 0$ に制限された経路を扱った。経路の制限がより複雑になれば経路和の結果を解析的に閉じた形で表わすことはできなくなるが、それは技術的な問題である。格子上では経路を一つ一つ数えることができるから、目的に合った経路をピックアップして足し上げるのは原理的に常に可能である。

§4 結び

筆者が格子上の経路和法に興味をもった理由の一つが前章で述べた初到達時刻の振幅の計算にあった。無限多重積分の形式では時間だけを離散化して、空間ゲートの時系列 $\{\Delta X_j\}$ 、即ち cylinder set、で経路 (の束) を表現する。一方、初到達時刻の振幅に寄与する経路は時間ゲートで通過場所を指定される。仮に、「時間ゲートで通過場所を指定された経路の和は (そのような経路の束は cylinder set として表現できないので) 無限多重積分の形式では扱えない」ということであればそれは無限多重積分の形式の限界を意味することになる。無限多重積分の形式では時間だけが離散化され、そこから cylinder set という考えが出て来

る。一方格子上の経路和法では時間、空間ともに離散化して両者を対等に扱う。そのため経路を空間ゲートで指定することも時間ゲートで指定することも共に可能となる。その結果、実際に前章で示したように、時間ゲートで通過場所を指定された経路も空間ゲートで指定された経路と全く同様に足し上げることができる。(F の計算では鏡像法を用いたが、それは単なる足し上げの技術である。) 従って「足し上げることのできる経路のタイプ」という観点からすると、格子上の経路和法の方が無限多重積分の形式よりも広い、とは言えないだろうか。この辺の事情は数学的にはどのようなことになっているのであろうか。御存知の方がいらしたら御教示頂ければ幸いである。

本稿では一次元の自由粒子しか扱わなかった。格子上の経路和法を一般的な方法とするためには越えるべきハードルは多い。まず多自由度系や外部ポテンシャルがある場合への拡張が不可欠である。自由粒子であれば、高次元、多粒子系への拡張は容易である。外部ポテンシャルがある場合でも、(9) に対応する差分方程式を導くこと自体は容易にできる。このとき \uparrow にスカラーポテンシャルの影響が現れ、 \nearrow 及び \searrow にベクトルポテンシャルの影響が現れて、複素遷移確率が $1 - \gamma_i$ や $\gamma_i/2$ といった定数ではなく「どこから遷移するか」に依存することがわかる。この場合でも自由粒子の場合と同じように (11) のスキームが成り立つと思われるが、まだその証明はできていない。格子路の重みが複雑になって経路和の実行が困難になるからである。外部ポテンシャルがある場合の扱いは今後の課題である。

格子上の経路和法は、時間、空間ともに離散化して微分方程式を差分方程式にもっていくだけの簡単な操作で構成できる。微分方程式として虚時間シュレディンガー方程式 (拡散方程式) を考えると、§2 と同様な格子上の経路和法 (ユークリッド格子法と呼ぼう) が構成できる。これは従来からよく知られているものである [6]。そこでは遷移は \nearrow と \searrow の二種類だけで、経路和の実行がより簡単になる。実はプロパゲータも初到達時刻の振幅も、ユークリッド格子法で計算した方が実時間格子法で計算するよりも経路和の評価が簡単である。(その結果、初到達時刻の振幅 F は、ブラウン運動でよく知られた「初到達時刻の確率分布」

をウィック回転したもの（の i 倍）であることがわかる。）しかしユークリッド格子法では「実時間での経路の足し上げ」という描像は崩れる。この文脈で言うと、本稿で示したことは「実時空格子上でもユークリッド格子上と同様に経路を一つ一つ足し上げるという描像を持った定式化ができる」ということである。ところでユークリッド格子法には、時間が虚数になる代わりに扱う量が実数になる、という利点がある。特に外場としてスカラーポテンシャルが加わっても、扱うべき量は適当な変換によって「純正な確率」（正かつ保存）となり [7]、量子力学が（虚時間における実の）確率過程と結びつく。しかしこの魅力的な性質も外場としてベクトルポテンシャル A を考えると失われてしまう。すなわち虚時間シュレディンガー方程式が $-iA \cdot \nabla$ といった項を含むので複素数を扱わざるを得なくなるのである。それならば最初から実時間で考えて複素数を扱う方が一貫していると言える。冒頭のタイトルでは実時間での定式化であることを暗に強調したつもりなのだが、それはこのような考察が背景にあったからである。

さて、微分方程式としてディラック方程式 $((1+1)$ 次元) を考えると、やはり実時空格子上の経路和法が構成できる。実はこれはファインマン自身によって経路積分法の開発のきわめて初期になされている [8]。（その後の発展については文献 4(1991) 及びその引用文献参照。）それならばファインマンはなぜシュレディンガー方程式に対しても同様なことを試みなかったのだろうか？ 無限多重積分の形式と格子上の形式とは内容的に同じものだ、と考えたのかも知れない。しかし、経路を一つ一つ足し上げるという描像が明確かどうかといった審美眼的なことは置くとしても、前章の事例などを考えると両者には質的に違う点があるのではないだろうか。最後にファインマンの教科書から、その中でディラック方程式に対する格子上の経路和法を取り上げる背景となった一文を引用しよう [9]。（引用文中の Eq. (2-22) は無限多重積分による経路和の定義式を指す。）

“So we feel that the possible awkwardness of the special definition of the sum over all paths [as given in Eq. (2-22)] may eventually require new definitions to be formulated.”

謝辞 江沢洋先生と中村徹先生から貴重なコメントを頂きました。この場をかりて感謝いたします。

文献

- 1 R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- 2 R. P. Feynman "The Development of the Space-Time View of Quantum Electrodynamics", Nobel lecture, 11 December 1965, in *Les Prix Nobel en 1965*, Nobel Foundation, Stockholm (1966); 邦訳が、江沢洋訳の「物理法則はいかにして発見されたか」, ダイヤモンド社, 1968 に収録されている。(p.247-254 に経路積分法発見の経緯。)
- 3 例えば、I. M. Gel'fand and A. M. Yaglom, *J. Math. Phys.* **1** (1960), 48.
- 4 T. Nakamura, 京都大学数理解析研究所 講究録 **701** (1989) 59; *J. Math. Phys.*, **32** (1991) 457.
- 5 A. Auerbach and S. Kivelson, *Nucl. Phys.* **B257** (1985) 799.
- 6 例えば、C. Itzykson and J-M. Drouffe, *Statistical Field Theory Vol. 1*, Cambridge University Press, Cambridge, 1989 (Chap. 1.1).
- 7 例えば、H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer-Verlag, Berlin, 1984 (Chap. 5.4).
- 8 文献 1 p.34-36.
- 9 文献 1 p.34.